

Tareas Introducción a la Física del Sólido/Física de Materiales

Prof. Victor Fuenzalida, Prof. Aux. Donovan Díaz

30 de julio de 2007

1. Bibliografía

1. Nevil Ashcroft y David Mermin, Solid State Physics
2. L.V. Azarov, Electronic Processes in Materials
3. Gerald Burns, Solid State Physics
4. Crank, A Primer in Diffusion Problems.
5. Cyrot y Pavuna, Introduction to Superconductivity and High Tc Materials (en el laboratorio, solo consulta)
6. S. Elliot, Physics of Amorphous Materials
7. Ibach y Lüth, Solid State Physics
8. Landau y Lifschitz, Elasticidad
9. J. Philibert, Atom Movements: Diffusion and Transport in Solids, Les éditions de Physique, 1991, ISBN 2-86883-161-3.
10. C.N.R. Rao & J. Gopalakrishnan, New directions in solid state chemistry
11. Rose-Innes y Rhoderick, Introduction to Superconductivity (en el laboratorio, solo consulta)

12. R. Zallen, The Physics of Amorphous Solids

Nota importante: la mayor parte de los problemas de las tareas se extraerá de esta lista. No todos estos problemas se preguntarán, y podrá incluirse otros que no están en este listado

2. Estructura Cristalina

2.1. Red recíproca

Demuestre que:

1. La red recíproca es una red de Bravais.
2. Si $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ son vectores primitivos de la red de Bravais, entonces los vectores

$$\vec{b}_i = \frac{\pi \epsilon_{ijk} \vec{a}_j \times \vec{a}_k}{[\vec{a}_1 \vec{a}_2 \vec{a}_3]}$$

lo son de la recíproca. El símbolo de Levi Civita ϵ_{ijk} vale 1 si (i,j,k) es una permutación par de (1,2,3), vale -1 si es una permutación impar y cero si dos índices son iguales

3. $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$.
4. La red recíproca de la recíproca es la directa.
5. Si $V(\Omega)$ es el volumen de la celda primitiva de la red de Bravais (recíproca), entonces: $V\Omega = (2\pi)^3$.
6. Si G es el grupo puntual de la red directa, ¿lo es también de la recíproca?

2.2. Empaquetamiento compacto

1. (Ashcroft y Mermin Capítulo 4 Problema 6) De las tres redes de Bravais cúbicas, el fcc es la más densa y la simple (sc) la menos densa. La estructura del diamante es menos densa que ambas. Una medida está dada por los números de coordinación:

<i>face centered cubic fcc</i>	12
<i>base centered cubic bcc</i>	8
<i>simple cubic sc</i>	6
<i>diamante</i>	4

Otra medida es el factor de empaquetamiento. Suponga que se coloca una esfera centrada en los puntos de cada una de esas estructuras, de modo que las esferas se tocan sin superponerse (todas tienen igual diámetro). Calcule la fracción del espacio realmente ocupada por las esferas (este es el factor de empaquetamiento)

- Además, averigüe el factor de empaquetamiento para un conjunto de esferas compactadas al azar y ordene los diferentes tipos de empaquetamiento según densidad. El empaquetamiento al azar está descrito en libros sobre sólidos amorfos (Vea The Physics of Amorphous Solids, R. Zallen, y Physics of Amorphous Materials, S. Elliot).
- En los casos anteriores, quedan huecos entre las esferas. Si éstas tienen radio a , ¿cuál es el radio de las máximas esferas que es posible poner en los huecos? ¿Cuántas por cada celda unidad? Conteste para los casos fcc, bcc, sc y diamante (Electronic Processes in Materials, L.V. Azarov; New directions in solid state chemistry p 42, C.N.R. Rao & J. Gopalakrishnan)
- Determine el tamaño (en nm) de los huecos octahédricos en el hierro para el γ -Fe (fcc) y para el α -Fe (bcc). ¿Cuál de las dos fases espera Ud. que disuelva más carbón? ¿Cómo se podría estabilizar (a temperatura ambiente) la fase γ -Fe y hacer un buen acero?

2.3. Interpretación geométrica de los Índices de Miller

- Sea $\vec{R}_{n_1 n_2 n_3}$ un vector de la red de Bravais perteneciente a un plano cristalino dado. Demuestre que:

$$\frac{n_1}{1/h} + \frac{n_2}{1/k} + \frac{n_3}{1/l} = 1 .$$

- Interprete geoméricamente h,k,l.
- Demuestre que la distancia $d(hkl)$ entre dos planos hkl adyacentes es $d_{hkl} = 2\pi/|\vec{k}|$ con $\vec{k} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$.
- Verifique que en el cristal cúbico de lado a se cumple que

$$d(hkl) = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

5. Determine cuáles son los planos más separados entre sí.
6. Muestre que la densidad de puntos de la red (por unidad de área) en un plano (hkl) es d/V , donde V es el volumen de la celda primitiva.
7. Muestre que en un cristal fcc los planos mas densos son los $\{111\}$.

2.4. Varios

Averigüe qué son y explíquelo claramente:

1. Politipos (New directions in solid state chemistry, C.N.R. Rao y J. Gopalakrishnan)
2. Eje principal
3. Enantiomorfos
4. Rotación impropia (sea bien explícito, es algo delicado)
5. Isómeros
6. Isómeros ópticos (proporcione un ejemplo clásico)
7. Dextrógiro y levógiro (este concepto se ocupa en bioquímica y biología molecular)
8. Función de distribución radial (radial distribution function). Explique de qué se trata, que información contiene, y cómo se ve para un sólido cristalino y para un amorfo.

2.5. Rotaciones propias en dos dimensiones

Considere una red de Bravais 2-dim a lo largo de la cual se elige un eje. Enumere cuatro puntos adyacentes sobre el eje con los rótulos "P", "1", "2", y "Q". La distancia entre puntos adyacentes es a . Se están buscando las rotaciones propias de la red. Para esto suponga que una rotación en $-\psi$ en torno a 1 así como una rotación en ψ en torno a 2 convierten a P y Q en puntos de la red, P' y Q' . Esto significa que ambas rotaciones son operaciones de simetría propias de la red. Note que $P'Q' \leq 3a$.

1. Demuestre que $P'Q' = a(1 + 2 \cos \psi)$

2. Verifique que los valores posibles de ψ (los que respetan la invariancia de la red) son soluciones de la ecuación $\cos \psi = (k - 1)/2$
3. Pruebe que las rotaciones propias no triviales son:
 - a) $R(\psi = \pi/3)$ de orden 6
 - b) $R(\psi = \pi/2)$ de orden 4
 - c) $R(\psi = 2\pi/3)$ de orden 3
 - d) $R(\psi = \pi)$ de orden 2. (Un eje es *de orden n* si $R^n = 1$.)
4. Se corta un cubo por un plano que pasa por el centro y es perpendicular a una diagonal. Qué figura resulta? Indicación: Este es un problema 3D. La idea es determinar el orden del eje de simetría de la figura resultante
5. Verifique que en 2D existen cuatro sistemas cristalinos y cinco redes de Bravais (describalos).
 - a) Cuadrada ($\psi = ?$) (orden = ?)
 - b) Hexagonal ($\psi = ?$) (orden = ?)
 - c) 2x rectangular ($\psi = ?$) (orden = ?)
 - d) Oblicua ($\psi = ?$) (orden = ?).

2.6. Defectos de Schottky

Sea ϵ la energía de formación de una vacante (energía para sacar un átomo desde el interior y ponerlo en la superficie del sólido).

1. Si hay \underline{n} defectos en un cristal con \underline{N} átomos, demuestre que hay $\Omega(n) = (n + N)! / (n! N!)$ configuraciones posibles de energía $E = n\epsilon$.
2. Demuestre que la entropía asociada (entropía de configuración) es

$$S(n) = K[-N \ln N - n \ln n + (N + n) \ln(N + n)]$$

si $N \gg n \gg 1$.

3. Use

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_V$$

para calcular n/N en función de la temperatura

4. Un valor típico es $\epsilon = 1eV$. Calcule n/N a 300K y a 1000K.

2.7. Centro F

Considere un cristal iónico con un defecto del tipo centro F. Este defecto se genera al estar ausente un ión negativo que es reemplazado por un electrón, el que se encuentra localizado. Un modelo simple es suponer al electrón encerrado en una caja cúbica de lado a. Suponga un valor razonable para a y determine en qué parte del espectro electromagnético (¿microondas, infrarrojo, visible, raxos x...?) se encuentran las excitaciones del sistema.

2.8. Defectos de Frenkel

Un defecto de Frenkel consiste en una vacante y una posición intersticial (un elemento ha abandonado su posición en la red y ocupa una posición intersticial). Sean ϵ_F la energía necesaria para formar un defecto de Frenkel, N el número total de átomos, N' el número total de intersticios (no necesariamente igual a N) y n el número total de defectos de Frenkel. Calcule n como función de ϵ_F , N , N' , y la temperatura.

3. Vibraciones

3.1. Deformaciones homogéneas

Una deformación homogénea es aquella en que el tensor de deformación es constante. Note que entonces el tensor de tensiones también es constante. Considere la extensión simple de una varilla que se tensa (o comprime) aplicando una fuerza P por unidad de área sobre los extremos. La varilla está orientada a lo largo del eje z .

1. Demuestre que $\sigma_{zz} = P$
2. Demuestre que todas las otras componentes son nulas
3. Pruebe que $u_{ij} = 0$ si $i \neq j$
4. Calcule u_{xx} y u_{yy}
5. Calcule u_{zz}
6. Muestre que la componente u_{zz} entrega el cambio relativo de la longitud de la varilla. El coeficiente P se llama coeficiente de extensión. Muestre que su recíproco es el módulo de Young o módulo de extensión E

7. Muestre que las componentes u_{xx} y u_{yy} dan la contracción relativa de la varilla en la dirección transversal y que la extensión longitudinal es el coeficiente de Poisson, σ . Mientras no se conozcan sustancias que se dilaten transversalmente al estirarse, se cumplirá $\sigma > 0$ (no hay motivos termodinámicos para imponer esa condición).
8. Calcule el aumento relativo de volumen de la varilla en función de P , y K .
9. Calcule la energía libre de la varilla estirada.

3.2. Ondas en cristales anisotropos

En clases se expresó el desarrollo de la energía libre de Helmholtz, f , a segundo orden en función del tensor de deformación, en términos de los invariantes del tensor, usando argumentos de simetría. Si el medio es anisótropo no se puede hacer esa simplificación y se debe expresar el desarrollo de orden dos en la forma más general posible, invariante cuadrático en u_{ij} (más general):

$$f = \frac{1}{2} \lambda_{iklm} u_{ik} u_{lm}$$

1. Demuestre que sin perder generalidad se puede imponer las siguientes condiciones:

$$\lambda_{iklm} = \lambda_{klim} = \lambda_{ikml} = \lambda_{lmik}$$

2. Calcule el número de componentes independientes de λ_{iklm} .
3. Demuestre que $\sigma_{ik} = \lambda_{iklm} u_{lm}$.
4. Escriba la ecuación de ondas en forma indicial para el vector desplazamiento (ahora no es posible pasar a la forma vectorial usual).
5. Considere una onda plana $u_j = u_{oj} \exp(k_i x_i - \omega t)$ y demuestre que sus componentes deben satisfacer la condición

$$\rho \omega^2 u_i = \lambda_{iklm} k_k k_l u_m$$

6. Demuestre que la relación de dispersión $\omega = \omega(k_i)$ en general entrega tres raíces diferentes para ω^2 y que ω es una función homogénea de grado 1 en las componentes del vector k_i .

7. Demuestre que la velocidad de grupo es independiente de la frecuencia, pero que depende de la dirección de propagación
8. Muestre que para un vector de onda k_i puede haber tres ondas con diferentes frecuencias y velocidades de grupo y que los desplazamientos de estas ondas son perpendiculares dos a dos.

3.3. Ondas de superficie

Las ondas de superficie o de Rayleigh son ondas elásticas que se propagan en las inmediaciones de la superficie de un cuerpo sin penetrar en él. Se pueden escribir en la forma vectorial de la siguiente forma

$$\vec{u}_s = \vec{u}_{sl} + \vec{u}_{st} ,$$

donde (como se verá en el desarrollo) \vec{u}_{sl} y \vec{u}_{st} no son independientes porque deben satisfacer condiciones de borde en la superficie de separación.

1. Suponga que se tiene la siguiente dependencia funcional:

$$\vec{u}_l = (\vec{u}_l)_o \exp(kx - \omega t) f_l(z)$$

$$\vec{u}_t = (\vec{u}_t)_o \exp(kx - \omega t) f_t(z)$$

Encuentre las funciones f_l y f_t y demuestre que la profundidad de penetración de la onda, para cada componente, está dada por:

a)

$$\chi_l = (k^2 - \omega^2/c_l^2)^{1/2} \quad y$$

b)

$$\chi_t = (k^2 - \omega^2/c_t^2)^{1/2} .$$

El medio elástico ocupa el semiespacio $z < 0$. item Escriba las condiciones de borde para el tensor de tensiones en la superficie sin considerar la variación de la superficie debida a la propia onda.

2. Reescriba las condiciones anteriores para el tensor de deformación.

3. Deduzca que en una onda de superficie el vector de desplazamiento se encuentra en un plano que contiene a la dirección de propagación y es perpendicular a la superficie, es decir $u_y = 0$ (aquí y es el eje 2)
4. En la onda de superficie \vec{u}_l y \vec{u}_t pierden su interpretación intuitiva de componentes longitudinal y transversal. Esto significa que \vec{u}_l y \vec{u}_t tienen ambos componentes en el plano definido antes.
5. Pruebe que:

a)

$$u_{tx} = \chi_t a g(\chi_t)$$

b)

$$u_{tz} = -ik a g(\chi_t),$$

con $g(\chi_t) = \exp(ikx + \chi_t z - i\omega t)$ donde a es una constante.

6. Pruebe que $u_{lx} = kb g(\chi_t)$ y $u_{lz} = -ib \chi_l g(\chi_l)$, donde b es una constante.
7. Calcule u_x y u_z y use las condiciones deducidas antes para probar que

$$a(k^2 + \chi_t^2) + 2kb\chi_t = 0 \quad ,$$

$$2a\chi_t k + b(k^2 + \chi_t^2) = 0 \quad .$$

8. Deduzca que $(k^2 + \chi_t^2)^2 = 4k^2 \chi_t \chi_l$.
9. Derive la relación de dispersión: $[(2k^2 - \omega^2/c_t^2)^4 = 16k^4(k^2 - \omega^2/c_t^2)(k^2 - \omega^2/c_l^2)]$
10. Pruebe que la anterior es la dispersión normal (es decir, ω depende linealmente en k). Escriba para ello $\omega/k = c_t \xi$.
11. Calcule ξ como función de c_t/c_l , resolviendo numéricamente la ecuación y grafique $\xi = \xi(c_t/c_l)$. Note que $c_l/c_t > \sqrt{2}$.
12. Demuestre que el cociente entre las amplitudes de la parte transversal y longitudinal de la onda es $[a/b = -[2 - \xi^2]/[2(1 - \xi^2)^{1/2}]]$ Grafíquela en el dominio de interés como función de ξ .

3.4. Tensor de tensiones

En clases se mostró que fuerza por unidad de volumen ejercida sobre el cuerpo deformado es:

$$f_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} .$$

1. Demuestre que el tensor de tensiones es simétrico. Indicación: Note que el torque $T_{ik} = F_i x_k - F_k x_i$ ejercido sobre un volumen V arbitrario debe poder expresarse en términos de los torques ejercidos sobre la superficie solamente.
2. Desarrollando la función de Helmholtz hasta orden 2 en el tensor de deformación, es decir, usando la expresión deducida en clases ($F = (\lambda/2)u_{ii}u_{kk} + \mu u_{ik}u_{ik}$) y definiendo $K = \lambda + 2\mu/3$, demuestre que:

$$F = \mu(u_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}u_{ll})^2 + \frac{K}{2}u_{ll}^2$$

Es decir, la energía libre de Helmholtz se puede escribir como la suma de una energía de compresión pura más otra de corte puro.

3. Demuestre que $\mu > 0$ y $K > 0$.
4. Demuestre que

$$\sigma_{ik} = K u_{ll} \delta_{ik} + 2\mu(u_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}u_{ll}) .$$

5. Derive la ley de Hooke:

$$u_{ik} = \frac{1}{9K}\delta_{ik}u_{ll} + \frac{1}{2\mu}(\sigma_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}\sigma_{ll}) .$$

6. Demuestre que si se cumple la ley de Hooke entonces

$$u_{ik} = \frac{\partial F}{\partial \sigma_{ik}} .$$

Indicación: Use el teorema de Euler para las funciones homogéneas.

3.5. Constantes elásticas

El antimonio de indio tiene simetría cúbica, habiéndose determinado los siguientes valores para las ondas de sonido:

- La densidad del material es $5.774,7 \text{ kgm}^{-3}$.

Dirección de propagación	Dirección de polarización	Velocidad en km/s
110	110	3,7664(3)
110	1-10	1,6251(2)
110	001	2,2862(2)
100	100	3,4068(3)
100	010	2,2864(2)

1. Determine primero el número de constantes elásticas independientes en un cristal con simetría cúbica.
2. Use esta información para determinar las constantes elásticas independientes λ_{iklm} .

3.6. Fonones 1D

3.6.1. Momentum

Considere la cadena lineal monoatómica. Calcule explícitamente el momentum total de la cadena completa. Verifique que si $k \neq 0$ el momentum total es nulo

3.6.2. Ecuación de ondas

Considere la cadena 1D. Tome el límite $a \rightarrow 0$, $n \rightarrow \infty$, de modo que $Na = \text{cte}$. Verifique que se recupera la ecuación de ondas del sonido.

3.7. Sistema de dos niveles

1. Encuentre la capacidad térmica de un sistema de dos niveles (energías 0 y ϵ) con degeneraciones arbitrarias d_1 y d_2 en ambos niveles

2. Dé una expresión para la temperatura T_m a la cual la capacidad térmica es máxima
3. Calcule explícitamente la capacidad térmica expresándola en términos de T_m y ϵ .
4. Bosqueje la capacidad térmica en función de la temperatura para $d_2/d_1 = 1/2, 1, 2$

3.8. Anarmonicidad de las oscilaciones

Considere un oscilador armónico clásico con pequeños términos anarmónicos, de modo que la energía potencial es $U = ax^2 + bx^3 + cx^4$. Use la suma sobre estados para demostrar que la energía promedio y el desplazamiento promedio con respecto al equilibrio están dados por:

$$\bar{E} = k_B T + \left[\frac{15b^2}{16a^3} - \frac{3c}{4a^2} \right] (k_B T)^2 \quad \bar{x} = - \left(\frac{3b}{4a^2} \right) k_B T$$

3.9. Momentum de un Cristal

El Hamiltoniano con el cual se puede describir un cristal es el siguiente:

$$H = \sum_{\vec{R}} \frac{\vec{P}(\vec{R})^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \phi[\vec{R} + \vec{u}(\vec{R}) - \vec{R}' - \vec{u}(\vec{R}')] + \sum_{i=1}^n v_{ij}(\vec{r}'_i - \vec{r}'_j) + \sum_{\vec{R}, i} w_i[\vec{r}'_i - \vec{R} - \vec{u}(\vec{R})]$$

donde el primer termino es la energía cinética de los iones, el siguiente termino es la energía debido a la interacción entre todos los iones; los siguientes dos términos representa el momentum de n partículas adicionales y el otro representa la interacción entre estas partículas, y el ultimo termino representa la interacción entre las ultimas partículas y los iones. (\vec{R} es un punto de la red de Bravais, $\vec{u}(\vec{R})$ es el desplazamiento de un ion a partir de su posición de equilibrio \vec{R} , \vec{r}'_i es la posición de una de las partículas adicionales). Asociado a las simetrías de un Hamiltoniano hay una ley de conservación. El Hamiltoniano de un cristal posee simetría relacionada con la simetría trasnacional de la red de Bravais, y la ley de conservación que se obtiene con esta es conocida como la conservación el momentum del cristal.

3.9.1. Invariancia de simetría

El Hamiltoniano es invariante bajo la siguiente transformación

$$\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_i + \vec{r}_0 \quad \vec{u}(\vec{R}) \rightarrow \vec{u}(\vec{R}) + \vec{r}_0, i = 1, \dots, n \forall \vec{R}.$$

Esta simetría da la conservación del momentum de los iones y las partículas y no la simetría en que estamos interesados. La conservación del momentum del cristal se obtiene cuando \vec{r}_0 es un vector de la red de Bravais \vec{R}_0 , Es decir:

$$\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_i + \vec{R}_0, \vec{u}(\vec{R}) \rightarrow \vec{u}(\vec{R} - \vec{R}_0), \vec{P}(\vec{R}) \rightarrow \vec{P}(\vec{R} - \vec{R}_0) \quad i = 1, \dots, n \forall \vec{R}$$

Vea que ambas son simetrías.

3.9.2. Hamiltoniano de los iones

Considere del Hamiltoniano del cristal solo los terminos que tienen que ver con los iones, realice una expansión del potencial de interaccion de los iones y demuestre que este se puede escribir de la forma:

$$U^{harm} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{R}', \mu, \nu} u_\mu(\vec{R}) D_{\mu\nu}(\vec{R} - \vec{R}') u_\nu(\vec{R}')$$

donde

$$D_{\mu\nu}(\vec{R} - \vec{R}') = \delta_{\vec{R}, \vec{R}'} \left[\sum_{\vec{R}'} \phi_{\mu\nu}(\vec{R} - \vec{R}') \right] - \phi_{\mu\nu}(\vec{R} - \vec{R}')$$

3.9.3. Modos normales de una red de Bravais

Encuentre los modos normales de una red de Bravais monoatomica, para esto discuta las simetrías que debe obedecer la matriz D , con respecto a que:

1. La red de Bravais posee simetría de inversión.
2. Un desplazamiento uniforme de todos los iones.

Escriba la ec. de movimiento asociada al Hamiltoniano que hemos estado considerando y encuentre los modos normales, luego traduzca las simetrías discutidas y explique las implicancias de estas simetrías en el espacio \vec{k} , con respecto a la matriz D .

3.9.4. Operadores a y a^+

En el problema del oscilador armónico cuántico, aparecen los operadores de aniquilación y creación los cuales, como ud. recordara, están expresados en términos de las coordenadas y los momentum. Encuentre los operadores de aniquilación y destrucción en términos de $\omega_s(\vec{k})$ y $\vec{\epsilon}_s(\vec{k})$, que es el vector polarización para un modo normal clásico, para el Hamiltoniano de los iones en la aproximación armónica para el potencial de interacción entre los iones. Luego escriba el Hamiltoniano en términos de los operadores recién encontrados.

3.9.5. Momentum del cristal

Describa en términos de operadores cuanticos los cuales producen las transformaciones, vistas en a), las cuales estan asociadas con la ley de conservación del momentum del cristal. A partir de la simetría con la cual se obtiene el momentum de un cristal identifique el generador de traslaciones asociado y encuentre sus autovalores los cuales serán el momentum del cristal.

3.9.6. Aplicaciones

Qué pasa si

1. Solo hay iones presentes.
2. Si las n partículas son electrones de conducción.
3. Si un neutron incide en la red de iones.

4. Propiedades térmicas

4.1. Anarmonicidad: Relaciones generales

1. Sea U la energía interna de un sólido cristalino y P su presión. Muestre que

$$P = -\frac{\partial}{\partial V} \left[U - T \int_0^T \frac{\partial U(T', V)}{\partial T'} \frac{dT'}{T} \right]$$

2. El coeficiente de expansión lineal α se define como

$$\alpha = \frac{1}{L} \left(\frac{\partial L}{\partial T} \right)_p$$

. Además

$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T$$

Muestre que

$$\alpha = \frac{1}{3V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \frac{1}{3B} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V$$

3. Deduzca que en un cristal armónico

$$P = -\frac{\partial}{\partial V} \left[U_{eq} + \frac{1}{2} \sum_s \hbar \omega_s(\vec{k}) + \sum_s \frac{-\frac{\partial}{\partial V}(\hbar \omega_s(\vec{k}))}{\exp(\beta \hbar \omega_s(\vec{k})) - 1} \right]$$

Indicación: Use la 1a ecuación con $x = \hbar \omega / T$ e integre por partes.

4.2. Anarmonicidad: Anomalías

En esta parte se muestra que un cristal exactamente armónico es anómalo: algunas de sus propiedades no corresponden a las de ningún sólido real. Considere una red de Bravais en que la energía potencial asociada a desplazamientos de los iones es exactamente armónica:

$$U = U_{eq} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \vec{u}(\vec{R}') D(\vec{R} - \vec{R}') \vec{u}(\vec{R})$$

Usted sabe que la frecuencia de un oscilador armónico no depende de la amplitud. Aquí probará que las frecuencias de los modos normales de una red no cambian al dilatarla o comprimirla. La red definida por los vectores \vec{R} se supone cúbica.

1. Suponga que la red es expandida o comprimida por agentes externos, demodo que la nueva red queda definida por los vectores $\vec{R}^* = (1 + \varepsilon)\vec{R}$. Llame \vec{u}^* a los desplazamientos de los iones con respecto a las nuevas posiciones de equilibrio y muestre que

$$\vec{u}(\vec{R}) = \varepsilon \vec{R} + \vec{u}^*(\vec{R})$$

donde $\vec{u}(\vec{R})$ es el desplazamiento con respecto a la red original.

2. Demuestre que la energía potencial de la red es

$$V = U_{eq} + \frac{1}{2}\varepsilon^2 \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \vec{R} \cdot D(\vec{R} - \vec{R}') \cdot \vec{R}' + \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \vec{u}^* \cdot D(\vec{R} - \vec{R}') \cdot \vec{u}^*(\vec{R}')$$

3. a) Qué representan los dos primeros términos?
 b) Qué término describe la dinámica de la red?
 c) Dónde se usó que el cristal es cúbico? (Esto es sutil)
4. Deduzca que la deformación (extensión o compresión) de la red no cambia las frecuencias normales.

4.3. Anarmonicidad: Propiedades físicas anómalas

1. Demuestre que la presión del cristal perfectamente armónico depende de su volumen pero no de su temperatura.
2. Pruebe que el coeficiente de dilatación térmica, α , se anula. Muestre además que

$$\alpha = \frac{1}{3B} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V$$

con

$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T$$

Note que la expansión térmica depende *solamente* de los efectos anarmónicos.

3. Muestre que las capacidades térmicas a volumen y presión constantes son exactamente iguales. (En un sólido real son muy parecidas.)
4. Muestre que los módulos de compresibilidad isotérmico y adiabático son iguales.

4.4. Dilatación térmica

En clase se atribuyó la dilatación térmica de los sólidos a los efectos anarmónicos. En un metal es posible que los electrones contribuyan de un

modo apreciable. Para determinar en qué medida es importante esta contribución, considere el vanadio metálico para el que se conocen los siguientes datos: A baja temperatura

$$c_v = aT + bT^3$$

con $a = 9,2 \cdot 10^{-3} [Jmol^{-1}K^{-1}]$ y $b = 3 \cdot 10^{-5} [Jmol^{-1}k^{-3}]$. El término aT representa la contribución electrónica y bT^3 la vibracional. El volumen molar es $v = 8,32 \cdot 10^{-6} m^3$ y $(1/B) = 6,37 \cdot 10^{-12} Pa^{-1}$.

1. Grafique (α/T) versus T^2 y muestre que a baja temperatura

$$\alpha = a'T + b'T^3.$$

2. Suponiendo que tiene sentido separar las contribuciones electrónica y vibracional, calcule un parámetro de Grünessein vibracional y uno electrónico a $1K$. Qué efecto es mayor?

4.5. Capacidad térmica del grafito

El grafito es una forma del carbono en que los átomos se encuentran fuertemente unidos en un plano, en el que forman anillos hexagonales. Los planos están débilmente unidos unos con otros. Suponiendo que ésto permite describir al grafito como un sólido bidimensional, calcule la capacidad térmica c_v a baja temperatura. ¿Cuál sería la capacidad térmica a alta temperatura, de tratarse de un sólido estrictamente bidimensional? ¿Qué capacidad espera Ud. realmente?

4.6. Difusión

1. Deduzca (deducción elemental) la ley de Fick
2. Busque en la literatura valores numéricos del coeficiente de difusión a temperaturas similares para sólidos, líquidos y gases, expresados en el SI.

4.7. Excitaciones elementales

Explique qué son:

1. Polarones

2. Excitones
3. Magnones
4. Rotones
5. Fluxones

4.8. Cadena molecular

Considere un cristal 1D constituido por moléculas de dos átomos iguales (por ejemplo N_2). Las vibraciones se pueden estudiar asignando constantes de acoplamiento diferentes $K_1 > K_2$. K_1 representa el acoplamiento entre dos átomos dentro de la molécula, mientras que K_2 el acoplamiento entre dos moléculas. Encuentre $\omega(k)$ para las ramas acústica y óptica. Verifique que en el límite de onda larga no existe dispersión para la rama óptica y que la constante intramolecular K_1 no aparece en el modo acústico.

4.9. Rotador rígido

Los niveles de energía rotacionales de una molécula diatómica están dados por $\epsilon_J = J(J+1)\hbar^2/2I$, donde $J = 0, 1, 2, \dots$ e I es el momento de inercia.

1. Calcule la suma sobre estados rotacional. No olvide que la degeneración es $2J+1$
2. Suponiendo que $k_B T \gg$ espaciado entre niveles reemplace la suma por una integral y calcúlela (ponga $x = J[J+1]$).
3. Determine la energía rotacional promedio y la capacidad térmica en este límite
4. La distancia internuclear en la molécula de HCl es 0.128 nm. Calcule la distancia en energía entre los niveles $J=0$ y $J=1$ y compárela con $k_B T$ a temperatura ambiente.

4.10. Sumas e integrales

En el modelo de Debye, en lugar de una suma, se realiza una integral usando la densidad de modos $g(\omega)$. Esto es lícito si existe una gran cantidad

de modos con energías menores que $k_B T$. Si las mediciones se realizan a $1 \mu K$, ¿de qué dimensiones debería ser la muestra para justificar este procedimiento?

4.11. Capacidad térmica en amorfos

Algunos aspectos de los sólidos amorfos se pueden describir suponiendo la existencia de una distribución de estados localizados con dos niveles de energía.

1. Si los niveles de energía de un sistema de dos estados son $\pm\epsilon$, demuestre que la energía promedio y la capacidad térmica están dados por

$$u = -\epsilon \tanh(\epsilon/k_B T)$$

y

$$C_V = k_B (\epsilon/k_B T)^2 \operatorname{sech}^2(\epsilon/k_B T)$$

2. Si los valores posibles de ϵ están igualmente distribuidos en el intervalo $[0, \epsilon_o]$, demuestre que si $k_B T \ll \epsilon_o$ la capacidad térmica es proporcional a la temperatura.

4.12. Difusión en superficies sólidas

Se conoce (por lo menos) dos mecanismos para la difusión de adátomos. Uno es el sustitucional, en que un adátomo reemplaza a un átomo de la superficie. El segundo, más conocido, es a través de saltos de un sitio a otro. Se llama sitio (site) a una posición en la superficie donde la adsorción es energéticamente favorable. Para pasar de un sitio a otro un adátomo debe saltar sobre una barrera de energía. Esquemáticamente, un adátomo verá la superficie como una sucesión de pozos y barreras. Debido a las vibraciones térmicas, un adátomo en un sitio está "tratando" de saltar a una de las posiciones vecinas con frecuencia ν , que es un promedio del espectro de fonones, depende débilmente de la temperatura y tiene un valor cercano a 10^{13} Hz. Debido a la barrera, sólo una fracción de estos saltos -dada por el factor de Boltzmann- es eficaz para migrar de un sitio a otro.

1. Suponga que el sitio i -ésimo está ocupado con probabilidad $P(i, t)$. Escriba una ecuación que exprese $P(i, t + \Delta t)$ en función de $P(i - 1, t)$,

$P(i, t)$, y $P(i + 1, t)$, para Δt pequeño, (se llama ecuación maestra, master equation) . Suponga, si lo necesita, $P(i, t)$ pequeño. Esto significa que hay pocos adátomos y que la probabilidad de que interactúen entre ellos (posiciones i e $i+1$ ocupadas simultáneamente, por ejemplo) es despreciable.

2. Pase a la variable continua $x = ia$, lo que define $P = P(x, t)$. Expanda la ecuación maestra hasta el primer orden no nulo y obtenga la ecuación de difusión.
3. Expresé el coeficiente de difusión D en función de la energía de activación E_{dif} para la difusión, la frecuencia promedio de fonones y la constante de red superficial.
4. Calcule D explícitamente para una energía típica $E_{dif} = 0,5 \text{ eV}$.
5. Muestre que si n es la densidad superficial de adátomos, $\vec{J} = -D\nabla n$ representa la corriente de difusión de adátomos. De este modo, la ecuación de difusión no es nada más que una ley de conservación o ecuación de continuidad $div \vec{J} + \partial n / \partial t = 0$.
6. ¿Qué forma adquieren la ecuación y la corriente cuando la difusión es anisotrópica? Esta situación es común.
7. Pasando otra vez al caso de difusión 1D, suponga que se ha superpuesto un campo F externo ($F = -\nabla\Phi$, energía potencial), de modo que la sucesión de pozos está inclinada. Demuestre que el movimiento de los átomos se sigue describiendo como una ecuación de continuidad, donde la densidad de corriente de adátomos tiene un término difusivo y un término adicional de arrastre.
8. Se llama movilidad μ (porque indica como responden las partículas ante el campo externo F) a la derivada de la velocidad de arrastre con respecto al campo eléctrico (caso no anisotrópico). Demuestre que la movilidad está relacionada con el coeficiente de difusión (relación de Einstein).

4.13. Solución de la ecuación de difusión

Una vez escrita la ecuación de difusión, no es mala idea resolverla. Hágalo en una dimensión suponiendo que la condición inicial es $n(x, t = 0) = \delta(x)$.

1. Pruebe que la solución es un paquete que se ensancha en el tiempo.
2. Calcule el ancho x_{dif} en función de t .

Un libro que se ocupa extensamente de resolver la ecuación de difusión es el de Crank, A Primer in Diffusion Problems, que incluye casos importantes como condición de borde constante en el tiempo (representa un gas a presión constante que difunde sobre un sustrato sólido, técnica usada para dopar semiconductores), condición inicial constante y de extensión finita (una película delgada que se deposita baja temperatura sobre un sustrato que es posteriormente calentado), etc. Otro libro interesante es el de J. Philibert, Atom Movements: Diffusion and Transport in Solids, (Les éditions de Physique, 1991, ISBN 2-86883-161-3)

5. Scattering por el cristal

5.1. Seccion eficaz para rayos x

Considere una onda plana monocromática que es difractada por un sólido (o cualquier otra cosa) que ocupa un volumen V . El campo total puede considerarse como la suma de la onda incidente más la difractada.

1. Si la densidad de carga asociada a los electrones es $-en(\vec{r})$, escriba las ecuaciones de Maxwell locales en el cuerpo (S.I.).
2. Verifique numéricamente que las frecuencias atómicas características son mucho menores que las de los rayos X.
3. Debido a lo anterior, la interacción electrón-rayos X es tan rápida que el electrón "no siente" el campo nuclear y puede considerarse "libre". Esto permite escribir

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E}$$

Deduzca que el campo eléctrico satisface

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \vec{E}$$

con $\omega_p^2 = \frac{ne^2}{m\epsilon_0}$.

4. Estime el orden de magnitud de ω_p y verifique que

$$\delta^2 = \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2 \ll 1$$

5. Un método para buscar una solución aproximada de (iii) es el siguiente: Defina $\vec{D} = (1 - \delta^2)\vec{E}$ y verifique que $\nabla \cdot \vec{D} = 0$.

6. Deduzca que

$$\nabla^2 \vec{D} + \frac{\omega^2}{c^2} \vec{D} = \nabla \times \nabla \times \delta^2 \vec{E} \quad (\delta^2 \text{ no es una constante})$$

Esta ecuación es más fácil de resolver que (iii). Note que $\delta^2 \vec{E}$ actúa como la fuente de \vec{D} , que está restringida al volumen V ($\delta^2 = 0$ fuera de V).

7. Del curso de electrodinámica se sabe que la solución formal de la ecuación

$$\nabla^2 \phi + q^2 \phi = -f(\vec{r}) \quad (f(\vec{r}) = 0 \text{ fuera de } V)$$

es

$$\phi = \frac{1}{4\pi} \int_V \frac{e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} f(\vec{r}') d^3x'$$

La dirección de observación es $\vec{q} // \vec{r}$. Verifique que la forma asintótica lejos de la fuente es

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi r} e^{iqr} f(\vec{q}) f(\vec{q}) \quad : \text{ transformada de Fourier de } f(\vec{r})$$

8. En el caso de la difracción de rayos X el detector está alejado y satisface la condición asintótica. Demuestre entonces que

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{e^{iqr}}{4\pi r} \int_V \nabla' \times \nabla' \times (\delta^2 \vec{E}_o e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'} d^3r' \quad ; \quad |\vec{q}| = |\vec{q}_o|$$

Indicación: Escriba $\vec{E} = \vec{E}_{inc} + \vec{E}_{difr}$, recordando que \vec{E}_{difr} se origina en el término $\delta^2 \ll 1$ ($O(\delta^4) = 0$).

9. Si \hat{r} es la dirección de observación, demuestre que

$$\vec{E} = -\hat{r} \times (\hat{r} \times \vec{E}_o) \frac{e^2}{4\pi mc^2 \epsilon_o} \tilde{n}(\vec{Q}) \frac{e^{iqr}}{r}$$

con $\vec{Q} = \vec{q} - \vec{q}_o$, $\vec{q} = q\hat{r}$ y $\tilde{n}(\vec{Q})$ transformada de Fourier de $n(\vec{r})$ sobre todo el volumen V.

10. Use (ix) para deducir la condición de Laue para un sólido cristalino.
11. Sean : $\theta = \text{ángulo}(\vec{q}, \vec{q}_o)$: ángulo entre la dirección de incidencia y la de observación; $\alpha = \text{ángulo}(\vec{E}_o, \hat{r})$: ángulo entre el campo incidente y la dirección de observación. (Indicación: No se confunda, $\Theta \neq \alpha$.)
12. Demuestre que la sección eficaz es

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Ne^2}{4\pi mc^2 \epsilon_o}\right)^2 \text{sen}^2 \alpha |n(\vec{Q})|^2$$

13. Calcule $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ si la radiación incidente es no polarizada. Nota: Los difractogramas miden $|n(\vec{q})|$. Si se midiera $n(\vec{q})$ sería posible reconstruir la función $n(\vec{r})$ (!).

5.2. Amplitud de difracción

Considere radiación electromagnética con frecuencia de rayos X incidiendo sobre un sólido según un vector \vec{k} (fuente \rightarrow muestra). La dirección de observación es \vec{k}' (muestra \rightarrow detector). Suponga que la amplitud (es decir, el campo eléctrico) de la onda difractada por un sector de volumen d^3x del sólido es proporcional a la carga eléctrica encerrada en dicho volumen.

1. Muestre que la contribución del volumen d^3x a la amplitud de la onda difractada es:

$$dA = Kn(r) \exp[\vec{q} \bullet \vec{r}] d^3x$$

donde

- a) K es una constante a determinar
 b) $n(\vec{r})$ es la densidad de electrones en el sólido

c) \vec{r} se refiere a un origen de coordenadas arbitrario

d) $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$

- Demuestre que el campo difractado es proporcional a la transformada de Fourier $n(\vec{q})$ de la densidad electrónica.
- Como el detector mide energía, que es proporcional al cuadrado del módulo del campo eléctrico, no almacena toda la información posible asociada al proceso de difracción. Escriba explícitamente la intensidad, poniendo todo lo irrelevante en una constante.
- El resultado anterior es válido para cualquier sólido, incluso uno amorfo, y para líquidos. Demuestre que si el sólido es un monocristal y, por lo tanto, la densidad de electrones es periódica:

$$n(\vec{r} + \vec{R}) = n(\vec{r}) \quad \forall \vec{R} \in \vec{R}$$

entonces la onda se difracta en algunas direcciones preferenciales.

- Calcule explícitamente $n(\vec{q})$ para un sólido ideal sin estructura, en el que $n(\vec{r})$ no sea constante en todo el volumen. Para fijar ideas, suponga una esfera de radio a . ¿Hay direcciones preferenciales?

5.3. Factor de estructura geométrico fcc

Considere un elemento que cristalice en el sistema fcc, dé un ejemplo concreto. Elija describir el cristal con una celda unitaria cúbica poliatómica. Calcule las reflexiones nulas, es decir, encuentre los índices de Miller hkl para los cuales no se obtienen reflexiones. Imprima los datos de la tarjeta correspondiente al elemento que eligió y verifique explícitamente su resultado

5.4. Factor de estructura geométrico para el diamante

La red del diamante se puede describir como fcc con una base biatómica, con una base de dos puntos, $(0,0,0)$ y $(a/4)(1,1,1)$. Encuentre las reflexiones no nulas para esta red.

5.5. Filtro de energía para neutrones

Se llena un tubo largo con polvo de un material cúbico simple de constante a . El tubo se alinea con la dirección de emisión de una fuente de neutrones, con el fin de filtrar sus energías. Muestre que el dispositivo funciona como un filtro de energía para los neutrones. ¿Pasan neutrones de alta o de baja energía? Dése un valor numérico razonable para a y determine cuál es la longitud de onda límite de los neutrones transmitidos. Determine además la energía en eV, velocidad en m/s y temperatura en K, límites. Considere sólo scattering elástico.

5.6. LEED

Una técnica muy empleada para el análisis estructural de superficies sólidas es LEED (Low Energy Electron Diffraction). Se estudia el diagrama de difracción de electrones de algunas decenas de eV, que solo penetran las primeras capas de átomos.

1. Suponga que un cristal se corta con mucha perfección según un plano y que todos los electrones se reflejan en la primera capa de átomos.
2. Determine las condiciones para que existan máximos de interferencia
3. ¿Qué diferencias cualitativas hay con la difracción de rayos X?

5.7. RHEED

Una técnica empleada para la caracterización de superficies sólidas es Reflective High Energy Electron Diffraction (RHEED). El experimento típico consiste en dirigir un haz de electrones de alta energía (100 KeV) con incidencia rasante sobre una superficie sólida. Se afirma que RHEED permite distinguir entre una superficie plana y otra rugosa. Explique cómo es esto posible. Indicación: ¿Qué forma tiene el espectro de difracción de una superficie rugosa, es decir, qué es lo que se ve en la pantalla? ¿Y el de una lisa?

5.8. SEX_{AFS}

Explique con cierto detalle en qué consiste la técnica SEXAFS -Montaje experimental -Principio físico -Información que suministra, especialmente en el caso de sólidos amorfos (Consulte el libro de Elliott, en el laboratorio)

5.9. RAMAN

Este problema incluye una actividad experimental. Se le entregarán dos muestras de una película delgada, ambas del mismo material. El ser tan delgadas es difícil establecer a qué fase pertenecen. Se trata de BaTiO_3 , cuya fase estable es tetragonal, pero que puede tener una fase cúbica metaestable a temperatura ambiente. -Pruebe experimentalmente que las dos muestras se encuentran en fases diferentes -Dé una explicación DETALLADA para ese hecho. Es necesario que consulte sobre las propiedades de la celda primitiva del BaTiO_3 tetragonal.

6. Gas de Fermi

6.1. Plasmones

Los electrones de un metal, así como los de un plasma, pueden realizar oscilaciones colectivas llamadas plasmones.

1. Demuestre que la frecuencia natural de oscilación ω_p está dada por

$$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{m_e \epsilon_0} \quad (SI)$$

Indicación: Use las ecuaciones de Maxwell y las de movimiento de los electrones. Considere sólo oscilaciones de pequeña amplitud, lo que permite despreciar los términos cuadráticos.

2. Calcule (numéricamente) ω_p para el Cu y para los metales alcalinos (Li, Na, K, Rb, Cs).

6.2. Transparencia metálica

En este problema se usa la teoría de Drude para determinar qué sector del espectro electromagnético es capaz de atravesar un metal. La ecuación de ondas para el campo eléctrico en un medio material es:

$$\nabla^2 \vec{E} + \epsilon \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E} = 0.$$

Considere el campo en el metal.

1. Use las ecuaciones de Maxwell con dependencia temporal $\exp(i\omega t)$, en ausencia de cargas ($\rho_e = 0$) pero con corriente óhmica $\vec{J}(\omega) = \sigma(\omega)\vec{E}(\omega)$ para deducirla.

2. Muestre que la correspondiente constante dieléctrica es compleja y depende de la frecuencia en la forma

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_o + i\sigma(\omega)/\omega$$

3. Muestre que en el límite de alta frecuencia ($\omega\tau \gg 1$)

$$\varepsilon(\omega) = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)\varepsilon_o$$

ω_p definido en la parte (i). Expresé el producto $\omega\tau$ en función de r_s , a_o y ρ (resistividad).

4. Muestre numéricamente que la condición de alta frecuencia se cumple para frecuencias ω cercanas a la frecuencia del plasma.

5. Lo último significa que existen situaciones físicas reales en las que la constante dieléctrica es negativa.

6. Muestre que en este caso ($\omega < \omega_p$) las soluciones de la ecuación de ondas para \vec{E} decaen exponencialmente y la radiación electromagnética no se propaga, pero sí lo hace para $\omega > \omega_p$.

7. No pierda de vista que ω_p es una propiedad del material, mientras que ω es la frecuencia de la luz con que se lo ilumina. Existe un valor para esta frecuencia, ($\omega = \omega_p$) tal que si $\omega > \omega_p$ el material es opaco, y transparente en el caso contrario. La siguiente tabla entrega valores de la longitud de onda λ (observada) bajo la cual los metales alcalinos se hacen transparentes. Calcule los valores teóricos y compa-

Metal	experimental	Teoria Drude
Li	200	
Na	210	
K	310	
Rb	360	
Cs	440	

re.

Complete esta tabla con un

par de metales de transición (Cu, Fe, Ni); busque en un libro λ_{exp} y calcule $\lambda_{teórico}$.

6.3. Paramagnetismo de Pauli

Considere un gas de Fermi a $T = 0$ inmerso en un campo magnético. Suponiendo que los electrones interactúan con el campo solamente a través de sus momentos magnéticos (no existen niveles de Landau), calcule la susceptibilidad magnética, χ_m , asociada a los electrones de conducción. Estímela numéricamente para un metal típico.

6.4. Gas de Fermi relativista

A medida que el gas de electrones libres se comprime, la energía media de los electrones aumenta hasta que la relación $\epsilon = p^2/2m$ deja de ser válida y debe ser reemplazada por la expresión relativista. Por simplicidad considere solamente el límite ultrarrelativista en el cual $\epsilon = cp$. Note que las relaciones $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ y $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ no se modifican.

1. Calcule la energía de Fermi ϵ_F
2. Calcule la densidad de estados y evalúela en ϵ_F
3. Calcule la energía total a $T = 0$
4. Recordando que la presión es la derivada de la energía con respecto al volumen, calcule la presión del gas a $T = 0$. Exprésela en función del volumen y la energía, $P = P(E, V)$.
5. Estimación numérica: ¿qué densidad debería tener el gas de electrones para que $\epsilon_F \sim 10 \text{ MeV}$? ¿Cuál sería la temperatura de Fermi?

6.5. Efecto Hall clásico

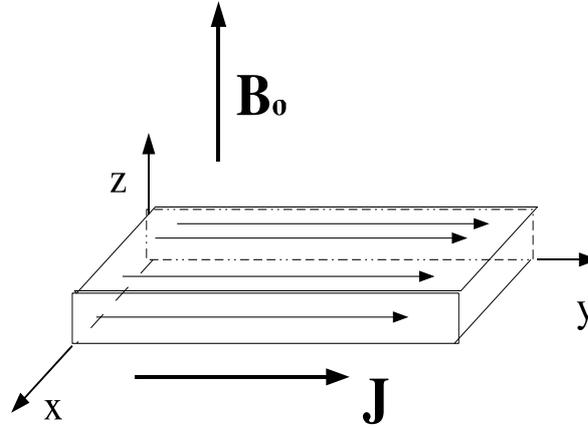
1. Demuestre que en el modelo de Sommerfeld-Drude los electrones en presencia de un campo magnético \vec{B} satisfacen la ecuación de movimiento

$$\frac{d\vec{p}}{dt} + \frac{\vec{p}}{\tau} = -ne\vec{E} - \frac{e}{m}\vec{p} \times \vec{B}$$

donde \vec{p} es el momentum por unidad de volumen.

2. Demuestre que en el estado estacionario se verifica la ley de Ohm

$$\vec{J} = \sigma_o \vec{E}$$



donde σ_o no depende de \vec{B} . Esta dependencia existe experimentalmente (magnetoresistencia), pero el modelo de Sommerfeld no la explica.

3. Considere la geometría de la figura. La muestra transporta una corriente $\vec{J} = J_o \hat{j}$ y está inmersa en un campo magnético $B_o \hat{z}$. Demuestre que se acumula carga en las dos caras (identifíquelas), lo que origina un campo perpendicular a la corriente

$$E_x = R_H B_o J_y$$

donde R_H no depende de B_o y se llama coeficiente de Hall. Encuéntrelo y explique cómo puede ser usado para determinar la densidad de portadores de carga.

6.6. Expansion de Sommerfeld

Con frecuencia aparecen expresiones de la forma $J(T) = \int_0^\infty \varphi(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$ en que φ es alguna función de la energía.

1. Demuestre que

$$J(T) = - \int_0^\infty \psi(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon,$$

en que $\psi(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon \varphi(\varepsilon) d\varepsilon$.

- Grafique $f(\varepsilon)$ y $-f'(\varepsilon)$ ($T \neq 0$) y explique por qué conviene hacer la expansión anterior.
- Pruebe que

$$J(T) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\psi^{(2n)}(\mu)}{n!} \right) K_n$$

con

$$K_n = - \int_0^{\infty} (\varepsilon - \mu)^n f'(\varepsilon) d\varepsilon$$

- En la práctica $\mu \gg kT$. Use este hecho para probar que

$$J(T) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\psi^{2n}(\mu)}{(2n)!} \right) (kT)^{2n} I_{2n}$$

donde I_{2n} son constantes.

- Deduzca que

$$\int_0^{\infty} \varphi(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\mu} \varphi(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \left(\frac{d\varphi}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon=\mu} + \frac{7\pi^4}{360} (kT)^4 \left(\frac{d^3\varphi}{d\varepsilon^3} \right)_{\varepsilon=\mu} + \dots$$

- Use la expansión para obtener el potencial químico y la energía del gas de Fermi tridimensional hasta términos cuadráticos en (T/T_F) , y úse ese resultado para obtener la capacidad térmica a primer orden en (T/T_F) .

6.7. Gas de Fermi bidimensional

- Encuentre la relación entre n [cm^{-2}] y k_f en dos dimensiones.
- Encuentre la relación entre k_f y r_s en dos dimensiones.
- Pruebe que la densidad de estados $g(\varepsilon)$ es constante. Calcúlela.
- Muestre que al ser g constante se anula cada término de la expansión de Sommerfeld para n , excepto el correspondiente a $T = 0$.
- Deduzca que $\mu(T) = \varepsilon_F$ a cualquier temperatura.

6. Deduzca exactamente a partir de $n = \int_0^\infty g(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon$ que

$$\mu(T) + k_B T \ln[1 + \exp(-\mu/(k_B T))] = \varepsilon_F$$

7. vi) Estime $\mu - \varepsilon_F$. Establezca numéricamente el orden de magnitud de la diferencia y explique la “falla” de la expansión de Sommerfeld.

6.7.1. Degeneración de los niveles de Landau

El hamiltoniano

$$\widehat{H} = \widehat{p}^2/2M$$

donde se usa M mayuscula para la masa del electrón, a fin de que no se confunda con el número cuántico magnético m. El momentum es el que se escribió en clases, luego

$$\widehat{H} = \frac{1}{2M}[(\widehat{p}_x - By)^2 + \widehat{p}_y^2 + \widehat{p}_z^2]$$

Entonces se observa que \widehat{p}_x y \widehat{p}_y conmutan con \widehat{H} , por lo que la dependencia en x y z debe ser función propia de estos operadores. Dadas las condiciones de borde, debe ser

$$\psi = \sin \frac{n\pi z}{l} \exp(ikx)\varphi(y)$$

Eso se escribió correctamente en clases, pero por fuerza bruta. Desarrollando (ahí si que me puedo haber equivocado) se llega a la ec de Schrödinger:

$$\frac{1}{2M}[\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{l^2}\varphi + (\hbar k - eBy)^2\varphi - \hbar^2\varphi''] = E\varphi$$

que me parece que quedó bien escrita. Ahora se hace la sustitución (ahí me equivoqué con el y_o):

$$E' = E - \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2Ml^2}$$

$$y_o = \frac{\hbar k}{eB}$$

$$\omega_c = \frac{eB}{m}$$

Con lo anterior se llega a la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\varphi'' + \frac{1}{2}M\omega_c^2(y - y_o)^2 = E'\varphi$$

Con las soluciones, que se escribieron correctamente,

$$E' = (m + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$$

y

$$E(n, m) = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2Mt^2} + (m + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$$

Nótese que la introducción del campo magnético convirtió el espectro (cuasi) continuo de energía en uno discreto.

Las funciones de onda dependen de k , pero la energía no, por lo que hay degeneración. Es razonable considerar que un nivel de Landau está localizado en el segmento de lado L de la placa de área L^2 si $0 < y_o < L$, lo que fija el valor máximo de k :

$$k_{\text{máx}} = \frac{eBL}{\hbar}$$

pero, por otra parte, $\Delta k = 2\pi/L$, por lo que el número de valores de k , que es el número de niveles de igual energía, será

$$N = \frac{k_{\text{máx}}}{\Delta k} = \frac{eB}{h}A$$

(es h , no \hbar). El número de estados de energía por unidad de área, es decir, la degeneración, será

$$D = \frac{eB}{h}$$

donde no se incluye ningún factor 2 porque el campo magnético elimina la degeneración de spin (aunque habría que sumar el término de spin a la energía)

6.8. Efecto Hall cuántico

1. Considere la “geometría Hall” típica (vea cualquier libro). Pruebe que la “resistencia” Hall, R_H , definida por el cociente $R_H = V_H/I$, está dada por $R_H = \frac{B}{ne}$, donde n es la densidad (2-dim) del gas de electrones bidimensional.

2. Demuestre que al considerar el spin los niveles de Landau están dados por

$$\varepsilon(n, r, s, k) = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2} + (r + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c + sg\mu_B B$$

donde $s = \pm \frac{1}{2}$ es el spin del electrón, $g (\sim 2)$ es el factor de Landé y $\mu_B = 9,27410 \cdot 10^{-24} [JK^{-1}]$ es el magnetón de Bohr. Indicación: La interacción entre el spin y el campo magnético (sin interacción spin-órbita) está dada por $-\mu \cdot \vec{B}$, con $\mu = sg\mu_B$

3. Explique por qué a bajas temperaturas existen valores específicos del campo magnético para los cuales se anula la conductividad paralela a la corriente I. Encuéntrelos.
4. Encuentre la relación entre B y T para que el efecto anterior sea detectable experimentalmente. Puede suponer que el gas bidimensional está fuertemente confinado, de modo que el único valor aceptable para n es $n = 1$ (el nivel de Fermi está muy por debajo de la rama con $n = 2$).
5. Sabiendo que $n \sim 10^{15} m^{-2}$ en una muestra típica y que es posible obtener campos magnéticos de hasta 30 Tesla en algunos laboratorios especialmente equipados, estime la temperatura máxima a la que se puede realizar la medición.
6. Demuestre que para que aquellos valores de B determinados en (iii) la constante de Hall, R_H , está dada por $R_H = \frac{h}{ie^2}$, donde i es un número entero *independiente de las propiedades de la muestra* (efecto Hall cuántico). Su medición sirve para definir el Ohm estándar con precisión que supera a la del Volt estándar determinado por el efecto Josephson (que se verá más adelante).

6.9. Emisión termoiónica

Suponga que el nivel de Fermi de un metal está a una energía ϕ por debajo del nivel del vacío. Demuestre que escapa del metal al vacío una densidad de corriente $J = AT^2 \exp(-\phi/kT)$ donde $A = 4\pi m_e k_b^2 / \hbar^3$, conocida como ecuación de Richardson Dushman.

6.10. Efecto Casimir

Recordar el problema de las vibraciones en el sólido: la energía del sólido se puede describir como la integral de un término de deformación \vec{u}^2 y uno de energía cinética \vec{v}^2 donde $\vec{v} = \partial\vec{u}/\partial t$ es la velocidad:

$$U = \int_v \left[\frac{1}{2} A \vec{u}^2 + \frac{1}{2} C \vec{v}^2 \right] d^3x,$$

La constante A es esencialmente la densidad y C una constante elástica. La descripción rigurosa es tensorial, pero permite identificar ambos términos, potencial y cinético. La energía del sistema cuántico correspondiente se encontró determinando los modos normales de frecuencias $w(\vec{k})$ y asignándole a cada uno la energía $(n+1/2)\hbar w$, lo que originaba la parte lineal de la rama acústica. La energía total del sistema está dada por:

$$U = \sum_{\vec{k}} (n + 1/2) \hbar w(\vec{k})$$

donde la suma es sobre todos los \vec{k} posibles, que son los que están en la primera zona de Brillouin.

La energía del campo EM en un volumen V en el vacío se puede expresar como la integral de la densidad de energía:

$$U = \int_v \left[1/2 \epsilon_0 \vec{E}^2 + 1/2 \vec{B}^2 / \mu_0 \right] d^3x$$

El integrando es similar al anterior, en que \vec{E}^2 hace las veces de energía potencial y \vec{B}^2 de cinética. Esta afirmación es incompleta, ya que falta establecer las reglas de conmutación para los campos, aquí se procederá solamente por analogía. También es posible encontrar los modos normales $w(\vec{k})$ y escribir la energía como en el caso anterior. Aquí interesa la energía del punto cero (a $T = 0$ donde los números de ocupación son cero):

$$U_0 = \sum_{\vec{k}} \hbar w(\vec{k}).$$

La suma es sobre todos los \vec{k} posibles (el factor 1/2 desapareció para dar cuenta de los dos estados de polarización del campo).

Caso 1D

Considerar la región entre $x = 0$ y $x = L$. Si en ambos planos hay un conductor perfecto, la componente paralela del campo se debe anular en

$x = 0$ y $x = L$, por lo que debe tener la dependencia funcional $\text{sen}(kx)$, que al imponer $\text{sen}(kL) = 0$ lleva a $k = n\pi/L$ con $w = ck$ (relación de dispersión para la onda EM).

1. Muestre que entonces la energía en la cavidad es:

$$U_0 = \sum_{\vec{k}} \hbar w(\vec{k}) = \pi \hbar c/L \sum_{n=1}^{\infty} n,$$

suma que diverge (paciencia).

Si no hay conductores y por lo tanto ninguna condición de borde todos los valores de k son admisibles y la energía del sistema es una integral:

$$U_{\text{libre}} = \sum_{\vec{k}} \hbar w(\vec{k}) \rightarrow \pi \hbar c/L \int_0^{\infty} x dx,$$

que también diverge. Eso es normal en electrodinámica cuántica, donde se recurre a trucos para quedarse con la parte regular. Para eso considere la diferencia:

$$\Delta E = U_0 - U_{\text{libre}} = \pi \hbar c/L \left[\sum_{n=1}^{\infty} n - \int_0^{\infty} x dx \right],$$

que también diverge si se calcula directamente.

Hasta ahora parece que nadie entiende bien por qué este procedimiento funciona, pero lo hace.

2. Aplique la regla de suma de Euler McLaurin (los f'son derivadas):

$$\sum_{j=1}^{j=\infty} f(j) = \int_0^{\infty} f(x) dx + \sum_{j=1}^{j=N+1} \left\{ f(j) - \int_0^1 f(j-1+x) dx \right\} \frac{1}{2} f(N+1) - \eta(N+1);$$

$$\eta(x) = \frac{1}{12} f'(x) - \frac{1}{720} f'''(x) + \frac{1}{30240} f^{(5)}(x) - \frac{1}{1209600} f^{(7)}(x) + \frac{1}{47900160} f^{(9)}(x) - \dots$$

para demostrar que:

$$\Delta E = -\pi \hbar c/12L$$

y que por lo tanto aparece una fuerza atractiva $\pi \hbar c/12L^2$ entre las placas.

El resultado anterior ignora que el sistema es realmente tridimensional. Suponga ahora que se tiene una caja de lados $D_x D_y L$ con $D \gg L$.

Esto significa que se puede ignorar que los k_x y k_y son discretos y aproximarlos directamente por continuos, lo que no se puede hacer con k_z .

3. Muestre que ahora la diferencia de energía entre las situaciones con caja y sin caja es:

$$\Delta E = \frac{D^2 \hbar c}{\pi^2} \left[\sum_{\nu=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dk_x \int_0^{\infty} dk_y \left(k_x^2 + k_y^2 + \frac{\nu^2 \pi^2}{L^2} \right)^{1/2} - \frac{L}{\pi} \int_0^{\infty} dk_x \int_0^{\infty} dk_y \int_0^{\infty} dk_z (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^{1/2} \right]$$

(1)

4. Use la regla de suma (indicación: considere hasta la tercera derivada) para probar que:

$$\Delta E = U_0 - U_{\text{libre}} = -\pi^2 \hbar c D^2 / 720 L^3 \quad .$$

5. Muestre que el resultado anterior conduce a una fuerza por unidad de área atractiva:

$$P_{\text{Casimir}} = \pi^2 \hbar c / 240 L^4.$$

6. Calcule la separación L en nm para que la presión anterior sea igual a la atmosférica.

¿Cuál será la presión de Casimir si $L = 1$ nm? Exprésela en bar.

Note que todo lo anterior es aproximado: los metales se hacen conductores a cierta frecuencia elevada, lo que disminuye la cota en las sumas e integrales y por lo tanto la fuerza de Casimir

6.11. Superred

Una superred es una sucesión de capas de diferente material, sin discontinuidad de la estructura cristalina. Suponga que ha sido posible construir una superred de dos metales A y B en que cada capa tiene un espesor $h=30$ nm ,

con A=oro y B=plata. Determine si a baja temperatura (T menor que 77 K) la conductividad de la superred es isótropa o anisótropa. Indicación: calcule el camino libre medio de los electrones en ambos metales. ¿Cómo cambia esta condición a temperaturas elevadas (T=373K)?

Datos: las resistividades de ambos metales a 77 K, 273 K y 373 K, en $\Omega^{-8} - m$ son 0.5 , 2.04 y 2.84 para el oro y 0.3 , 1.51 y 2.13 para la plata, respectivamente.

7. Teoría de Bandas

7.1. Teorema de Bloch

1. Sea $H = p^2/2m + V(\vec{r})$ el hamiltoniano de un electrón en la red periódica, entonces $V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$ para todo \vec{R} perteneciente a la red de Bravais. Demuestre entonces que la función de onda es de la forma

$$\phi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u(\vec{r})$$

con $u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{R})$.

2. El operador de traslación “propio” de la red se define por

$$T_R f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$$

con \vec{R} en la red.

3. Demuestre que $[H, T_R] = 0$ y $[T_R, T_{R'}] = 0$, i.e que H y todos los T pueden diagonalizarse simultáneamente.
4. Si $t(\vec{R})$ es el valor propio de T_R asociado a Φ , i.e. $T_R\Phi = t(\vec{R})\Phi$. Demuestre que

$$t(\vec{R} + \vec{R}') = t(\vec{R})t(\vec{R}')$$

5. Sea $t(\vec{a}_1) = t_1$, con $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ vectores generadores de la red. Muestre que si $\vec{R} = \sum_i n_i \vec{a}_i$, entonces $t(\vec{R}) = t_1^{n_1} t_2^{n_2} t_3^{n_3}$
6. Como siempre se puede escribir $t_i = \exp(2\pi i x_i)$, la cual es la ecuación que define los x_i , deduzca que

$$t(\vec{R}) = \exp(i\vec{R} \cdot [x_1\vec{b}_1 + x_2\vec{b}_2 + x_3\vec{b}_3])$$

7. Defina $\vec{k} = \sum_i x_i \vec{b}_i$ y demuestre que

$$T_R \Phi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) \Phi(\vec{r})$$

8. Muestre que

- a) $\Phi(\vec{r} + \vec{R}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) \Phi(\vec{r})$;
- b) $\Phi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) u(\vec{r})$, $u(\vec{r} + \vec{R}) = u(\vec{r})$, que son formas equivalentes del teorema de Bloch.
- c) \vec{k} es desconocido por ahora y parte del problema consiste en determinarlo. Los valores posibles de \vec{k} quedan determinados por las C.B. periódicas vistas en clase. Note que los \vec{k} son reales, por lo que la función de Bloch $\psi = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u$ corresponde a una onda plana ($e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$) modulada por una amplitud con la periodicidad de la red.

7.2. Modelo de Kronig-Penney

El modelo de Kronig-Penney, aunque poco realista, es uno de los pocos potenciales periódicos que admiten una solución sencilla. Considere un problema 1-dim con un potencial consistente en un arreglo periódico de distribuciones de Dirac:

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} a \cdot V_o \delta(x - na)$$

donde V_o es la intensidad del potencial (a se introduce para que V_o tenga dimensiones de energía). Defina las magnitudes adimensionales

$$\alpha^2 = \frac{2mEa^2}{h^2}$$

$$b^2 = \frac{2mV_o a^2}{h^2}$$

$$q = \frac{mV_o a^2}{h^2}.$$

1. Escriba (en general) la condición de contorno para la función de onda y su derivada en $x = 0$.

2. Luego, use el teorema de Bloch para escribirlas explícitamente.
3. Exprese la condición para que (ii) tenga solución no trivial determinante secular).
4. Calcule el determinante y redúzcalo a una ecuación trascendente que defina implícitamente la energía E como función del vector de onda k (el que aparece en el teorema de Bloch).
5. Deduzca que en el límite de partícula libre se reobtiene la energía conocida pero en forma de estructura de bandas.
6. Considere el caso de una partícula de baja energía. Muestre que en este límite

$$E(k) = E_o + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} .$$

Calcule m^* y pruebe que puede ser mayor, menor o igual a m . Esto significa que una partícula cerca del “fondo” de la banda se comporta como una partícula libre pero con una masa efectiva m^* .

7. Deduzca que en el caso 1-dim la densidad de estados es

$$g(E) = \frac{1}{\pi} \frac{dk}{dE}$$

y calcule explícitamente $\frac{dk}{dE}$ para obtener $g(E)$. Muestre que (en este caso) diverge si $ka = n\pi$.

8. Demuestre que en general existen zanjas de energía prohibidas, es decir, existen valores de energía E para los cuales no existen estados de Bloch.
9. Muestre que para los valores de E prohibidos la ecuación no tiene solución para k real.

7.3. Más Kronig Penney

Para el potencial de Kronig-Penney resuelto en el problema anterior dése usted mismo un ancho a y la altura V_o de la barrera de potencial, justificando la elección de los valores numéricos.

1. Resuelva numéricamente y calcule los anchos de las primeras dos brechas de energía.

2. Grafique las 3 primeras bandas en los esquemas de zona: *reducida*, *extendida* y *periódica*.
3. Calcule y grafique la densidad de estados en función de la energía para las dos primeras bandas.

7.4. Densidad de estados del electrón de Bloch

Considere una suma de la forma $\langle f \rangle = \frac{2}{V} \sum f_n(k)$ en que la suma se extiende sobre todos los estados y el factor 2 da cuenta de la degeneración de spin.

1. Muestre que si el volumen V del cristal es muy grande se cumple que

$$\langle f \rangle \rightarrow 2 \sum_n \int f_n(k) \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$$

donde la integral se lleva acabo en la 1ª zona de Brillouin.

2. Si $f_n(k)$ depende de k solamente a través de la energía ϵ , i.e. $f_n(k) = f(\epsilon_n(k))$, demuestre que $\langle f \rangle$ se puede escribir como

$$\langle f \rangle = \int g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon ,$$

integral sobre todos los valores de ϵ , con $g(\epsilon) = \sum_n g_n(\epsilon) d\epsilon$ y

$$g_n(\epsilon) = \int \delta(\epsilon - \epsilon_n(k)) \frac{d^3k}{4\pi^3} . \quad (*)$$

3. Use las propiedades de la distribución de Dirac para probar que

$$g_n(\epsilon) = \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{dS}{|\nabla \epsilon_n(k)|} , \quad (**)$$

donde $S(\epsilon)$ es la superficie $\epsilon_n(k) = \text{cte}$ en la banda n-sima.

4. Rederive escribiendo

$$g(\epsilon) d\epsilon = \left(\frac{1}{V} \right) \cdot dn$$

en que dn es el número de estados en la banda n-ésima con energías entre ϵ y $\epsilon + d\epsilon$.

5. Muestre que

$$g_n(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{1}{4\pi^3} \int d^3k \cdot \quad .$$

6. Sea $\delta_k(k)$ la distancia (normal) entre las superficies $\varepsilon_n(k) = \varepsilon$ y $\varepsilon(k) = \varepsilon + d\varepsilon$, que en general depende de k . Muestre que entonces se cumple

$$g_n(\varepsilon)d\varepsilon = \int_{S_n(\varepsilon)} \delta(k) \frac{dS}{4\pi^3}$$

7. Expresar $\delta_k(k)$ en términos de $\varepsilon(k)$ y rederive así la ecuación.

8. Muestre que el caso del electrón libre (Sommerfeld) se reobtiene como caso límite.

9. Demuestre que $\nabla\varepsilon(k)$ necesariamente se anula en una superficie. En general $g_n(\varepsilon)$ converge pero sus derivadas no lo hacen (no se pide demostrarlo).

7.5. Modelo semiclásico del electron

El modelo semiclásico para la dinámica del electrón supone que no existen transiciones entre las bandas. Este problema proporciona una estimación grosera de las condiciones para que esto ocurra. Si el potencial periódico tiende a cero existe degeneración de bandas cuando k está en los planos de Bragg. En este caso las transiciones interbandas son posibles. El potencial periódico, en general, remueve la degeneración, impidiendo las transiciones.

1. Considere un electrón representado por un paquete de ondas de ancho Δk . Demuestre que la incertidumbre en la velocidad, Δv , es

$$\Delta v \approx \frac{1}{h} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2} \right) \Delta k$$

Para que la descripción tenga sentido, la incertidumbre en v debe ser mucho menor que la velocidad electrónica típica. Deduzca entonces que

$$\Delta k \ll \frac{h v_F}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}}$$

2. Demuestre que en el plano de Bragg definido por G_1 y G_2 se cumple que

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \approx \frac{1}{E_G} \left(\frac{\hbar^2 G}{m} \right)^2$$

donde $G = G_2 - G_1$ es el ancho de la banda prohibida. Nota: Sean \vec{G}_1 y \vec{G}_2 vectores cualesquiera pero fijos de la red recíproca. El plano de Bragg asociado a ellos es perpendicular a $\vec{G}_2 - \vec{G}_1$ y divide el trazo que los une. Por lo tanto, buscar la degeneración de k equivale a buscar el plano de Bragg.

3. Para que la degeneración sea relevante, esta debe ocurrir en bandas cercanas al nivel de Fermi. Use este hecho para deducir que

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \approx \frac{\hbar^2 v_F^2}{E_G}$$

y

$$\Delta k \ll \frac{E_G}{\hbar v_F}$$

4. Encuentre un límite inferior para la incertidumbre en la posición del electrón y deduzca que la incertidumbre en su energía potencial en presencia del campo eléctrico satisface

$$e\Delta\Phi \gg \frac{e\hbar v_F}{E_G}$$

5. Si esta incertidumbre es comparable al ancho de la banda prohibida, puede haber transiciones interbandas sin violar la conservación de la energía. Muestre que una condición necesaria para que estas condiciones no ocurran es

$$eaE \ll \frac{E_G^2}{E_F}$$

Use el hecho que $\hbar v_F \approx E_F$, donde a es la constante de la red.

6. Es posible usar este resultado para deducir una restricción análoga para la intensidad de campo magnético.
7. Escriba el Hamiltoniano en dos dimensiones para un electrón libre en un campo \vec{B} uniforme y perpendicular al plano del electrón. Muestre que tiene la forma de un oscilador armónico con frecuencia $\omega = eB/mc$.

8. Deduzca que no es posible localizar al electrón en el espacio \vec{k} con una certeza en la posición mayor que

$$(\Delta k)^2 = \frac{m\omega_c}{\hbar}$$

y que una condición necesaria para que no hayan transiciones interbandas es

$$h\omega_c \ll \frac{E_G^2}{E_F}$$

7.6. Bandas

La figura muestra la estructura de bandas del arsenuro de galio, GaAs, en la primera zona de Brillouin ($a=0,56534$ [nm] a 300 K; cúbico).

1. Represente la banda de conducción en el esquema de zona periódica a lo largo de las direcciones [100] y [111].
2. Represente la banda de conducción en el esquema de zona extendida a lo largo de las direcciones [100] y [111].
3. Dopando este material es posible construir una estructura en la cual “paredes” n y p se suceden regularmente, separadas por zonas intrínsecas, i , (estructura “nipi”), como en la figura adjunta.
4. Notando que el efecto de esta superestructura es superimponer un potencial débil y periódico, con periodicidad mayor que (y múltiplo de) la constante de la red, *adivine* cómo se modifican las bandas representadas en (ii). Indicación: Inspírese en su solución del modelo de Kronig-Penney.

7.7. Electrón semiclásico

Considere el movimiento semiclásico de un electrón de Bloch en un campo magnético constante y uniforme \vec{B} . Sea \vec{a}_\perp la componente de \vec{a} en el plano \perp a \vec{B} . En clases se demostró que (SI) $d\vec{k}_\perp/dt = -(e/\hbar^2) \nabla \epsilon(\vec{k})_\perp \times \vec{B}$ y que el período se puede escribir de la siguiente forma

$$T = \frac{\hbar^2}{eB} \oint \frac{dk_\perp}{|\nabla \epsilon(\vec{k})_\perp|}$$

1. Sea $S(\epsilon, k_z)$ el área del plano $\vec{k} = k\hat{z}$ interior a la superficie $\epsilon(\vec{k}) = cte$. Muestre entonces que

$$T = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{\partial S(\epsilon, k_z)}{\partial \epsilon}$$

Haga una figura. Recupere el límite de la partícula libre.

2. Use la analogía con la partícula libre para definir un masa efectiva ciclotrón adecuada, m^* (en general no coincide con las otras).
3. Describa cualitativamente el movimiento en el espacio real y muestre que la proyección de la órbita en el plano \perp a \vec{B} no es necesariamente una curva cerrada.

8. Semiconductores

8.1. Estadística de niveles donadores

Problema 28.4 Ashcroft y Mermin.

8.2. La región deprimida en equilibrio térmico

Problema 29.1 Ashcroft y Mermin.

8.3. Juntura pn abrupta, pero no tanto

Dése valores razonables de N_a y N_d para el silicio a temperatura ambiente. Use los resultados derivados en clases para la juntura sin polarizar como punto de partida para resolver numéricamente el sistema de ecuaciones autoconsistente, hasta que le parezca que converge (puede usar algoritmos mejores, si los tiene disponibles). Grafique sus resultados para $n(x)$, $p(x)$ y $\Phi(x)$ comparándolos con los resultados analíticos aproximados. Grafique además la diferencia $\Phi_{numérico}(x) - \Phi_{aproximado}(x)$ (elija $\Phi(-\infty) = 0$).

8.4. Corriente de saturación.

1. Sea τ_n la constante de tiempo de recombinación para electrones. Esto significa que la probabilidad de recombinarse con un hueco en un tiempo dt es $dP = dt/\tau_n$. Si la densidad de electrones en equilibrio es n_0 pruebe

que $dn/dt = -(n - n_o)/\tau_n$ donde n es la densidad de electrones. Lo mismo es cierto para los huecos.

2. Muestre que en el caso visto en clases (huecos minoritarios inyectados) se cumple la ecuación

$$\nabla \bullet \vec{J}_h + \frac{p - p_o}{\tau_h} = 0$$

Debe justificar el escribir esta ecuación en estado estacionario, donde parecería que $\nabla \bullet \vec{J}_h = 0$.

3. Pruebe que para la juntura en equilibrio ($V=0$) se cumple $p_2 =: p(x = d_2^+) = N_a \exp[-e\Delta\Phi_o/k_B T]$.
4. Reescriba el resultado anterior para la juntura polarizada y demuestre que $p_2 = \frac{n_i^2}{N_a N_d} \exp[eV/k_B T]$.
5. Calcule la corriente de difusión de huecos inmediatamente a la derecha de la zona deprimida (es decir en $x = d_2^+$).
6. Demuestre la ecuación del diodo ideal:

$$J(V) = J_o(\exp[eV/k_B T] - 1)$$

con

$$J_o = \frac{n_i^2 D_h}{N_d L_e} + \frac{n_i^2 D_e}{N_a L_h}$$

7. Estime el tamaño de la corriente eléctrica de saturación en una juntura p-n a temperatura ambiente si el hiato de energía de la banda es 0.5 eV, las concentraciones de donadores (o aceptores) de 10^{18}cm^{-3} , los tiempos de recombinación de 10^{-5}s y las distancias de difusión de 10^{-4}cm .

8.5. Juntura p-i-n

Considere una juntura análoga a la p-n estudiada en clases, pero con una región intrínseca de ancho h entre las zonas p y n. La densidad de aceptores en la zona p es $N_A = N_1$, no habiendo donadores. La densidad de donadores en la zona n es $N_D = N_2$, no habiendo aceptores. La frontera p-i corresponde a $x = 0$. Use un modelo similar al de la juntura abrupta suponiendo zonas deprimidas d_1 y d_2 .

1. Determine las densidades de carga en las zonas:
 - $x < -d_1$
 - $-d_1 < x < 0$
 - $0 < x < h$
 - $h < x < h + d_2$
 - $h + d_2 < x$
2. Calcule el potencial electrostático en cada región
3. Calcule d_1 y d_2 en función de h y $\Delta\Phi = \Phi_\infty - \Phi_{-\infty}$ (Asegúrese tomando el límite $h \rightarrow 0$)
4. ¿Qué ocurre si h es grande? Precise Ud. mismo el significado de *grande*.

8.6. Juntura n-p no abrupta

Resolver el problema de la juntura n-p no abrupta, en la cual las densidades de donadores y aceptores decaen linealmente hacia la juntura. (El valor constante se obtiene a una distancia a de la juntura.)

8.7. MOS

Considere el MOS característico: Metal/Aislador/Semiconductor

- I. Metal
- II. dieléctrico
- III. Semiconductor

Sean: σ : densidad de carga superficial en la interfaz metal-dielctrico; ϕ_s : potencial en la interfaz dieléctrico-semiconductor.

1. Muestre que con las aproximaciones usadas en clases la densidad de carga es

$$\rho = e(N_D - N_A + p - n)$$

con

$$n = n_o e^{\frac{e\phi}{kT}}$$

y

$$p = p_o e^{\frac{-q\phi}{kT}}$$

donde n_o y p_o están dados por la condición

$$N_D - N_A = n_o - p_o \quad \text{si } x \rightarrow \infty .$$

2. Las condiciones de contorno son

$$\phi(I) = V$$

$$\phi(\infty) = 0$$

$$\phi(x = 0) = \phi_s \quad (\text{por determinar}) .$$

Si $x > 0$ demuestre que el campo eléctrico E está dado por

$$E = \pm \frac{2kT}{e\lambda_p} G\left(\phi, \frac{n_o}{p_o}\right)$$

con

$$\lambda_p^2 = \frac{2kT\varepsilon_{III}}{p_o e^2} \quad , \quad G\left(\phi, \frac{n_o}{p_o}\right) = e^{\frac{-e\phi}{kT}} + \frac{e\phi}{kT} - 1 + \frac{n_o}{p_o} \left(e^{\frac{e\phi}{kT}} - \frac{e\phi}{kT} - 1 \right) .$$

Indicación: Multiplique la ecuación de Poisson

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_{III}} \quad (SI)$$

por $d\phi/dx$.

3. Demuestre que

$$\sigma = \pm \varepsilon_{III} \frac{2kT}{e\lambda_p} G\left(\phi_s, \frac{n_o}{p_o}\right)$$

4. Deduzca que

$$V - \phi_s = \pm \frac{\varepsilon_{III} 2kT}{C_{ox} e\lambda_p} G\left(\phi_s, \frac{n_o}{p_o}\right)$$

donde C_{ox} es la capacidad por unidad de área del óxido.

5. El MOS puede considerarse como dos condensadores en serie. El óxido tiene capacidad constante. El semiconductor tiene capacidad variable por unidad de área dada por

$$\frac{1}{C_{III}} = \frac{d\phi_s}{d\sigma} .$$

Verifique que

$$\frac{1}{C_{III}} = \frac{1}{C_{ox}} \frac{d\phi_s}{dV}$$

6. Dése valores numéricos “razonables” y grafique ϕ_s en función de V . (Use (iv), calcule $V(\phi_s)$ y grafique intercambiando los ejes.)
7. Grafique C_{III} y la capacidad del semiconductor en función de V .

9. Superconductividad

9.1. Ecuaciones de London

Se acepta que las ecuaciones de Maxwell se cumplen en el superconductor:

1. $\nabla \cdot \vec{E} = \rho/\epsilon_o$
2. $\nabla \cdot \vec{B} = 0$
3. $\nabla \times \vec{E} + \partial\vec{B}/\partial t = 0$
4. $\nabla \times \vec{B} = \mu_o(\vec{J} + \partial\vec{D}/\partial t)$, que se reduce a $\mu_o\vec{J}$ a baja frecuencia

Ecuaciones de London

1. Suponga que los superelectrones, de densidad n_s , no experimentan colisiones. De ahí deduzca, con un método análogo al usado en el modelo de Drude, que la (super) corriente satisface

$$\frac{\partial\vec{J}}{\partial t} = \frac{n_s e^2}{m} \vec{E}$$

Esta ecuación describe la resistencia cero.

- Use la tercera ecuación de Maxwell para deducir que

$$\vec{B} = -\frac{m}{n_s e^2} \nabla \times \vec{J}$$

Esta ecuación describe las propiedades diamagnéticas

- Combine las ecuaciones para deducir que el campo magnético satisface la ecuación:

$$\vec{B} - \lambda^2 \nabla^2 \vec{B} = 0$$

Muestre que en el caso 1D el resultado es un campo magnético que se extingue exponencialmente hacia el interior del superconductor masivo con un espesor de penetración λ .

- Deduzca la forma alternativa de presentar el diamagnetismo:

$$\vec{A} + \mu_0 \lambda^2 \vec{J} = 0$$

Donde \vec{A} es el potencial vectorial magnético

Note que las ecuaciones de London no son exactas, entregan solamente una descripción fenomenológica aproximada de la electrodinámica del superconductor.

9.2. Termodinámica de la transición superconductora

El trabajo por unidad de volumen realizado sobre un material al aumentar el campo magnético en dB es $dW = HdB$.

- Muestre que

$$dW = d\left(\frac{\mu_o H^2}{2}\right) + \mu_o H dM$$

e interprete cada término por separado.

- Use la analogía PdV (trabajo mecánico) con $\mu_o H dM$ (trabajo de magnetización) para definir la función de Gibbs de un material con magnetización M (tenga cuidado con los signos).
- Si la temperatura y la presión se mantienen constantes, que es lo que ocurre durante un cambio de fase, pruebe que $dg = -\mu_o M dH$ y que el cambio de energía libre debido a la magnetización es

$$g(H, T, P) - g(0, T, P) = -\mu_o \int M dH$$

4. En el caso de un superconductor, verifique que el campo magnético H aumenta la energía libre. ¿Qué ocurre con un material ferro-, para-, diamagnético?
5. Calcule $g_s(H, T, P) - g_s(0, T, P)$ para el superconductor.
6. Recuerde que el estado normal es casi no magnético, por lo que su energía libre casi no cambia por efecto del campo magnético.
7. De este hecho deduzca la existencia del campo magnético crítico, H_c , y calcúlelo en términos de $g_n(0, T, P)$ y $g_s(0, T, P)$, donde s denota el estado superconductor y n el estado normal. Note que la necesaria existencia del campo crítico se deduce de consideraciones puramente macroscópicas.
8. Demuestre que la diferencia entre las energías libres en los estados normal (independiente de H) y superconductor se puede colocar como

$$g_n - g_s(H) = \frac{1}{2}\mu_o(H_c^2 - H^2)$$

Además, deduzca que

$$S_n - S_s = -\mu_o H_c \left(\frac{dH_c}{dT} \right) ,$$

siendo S la entropía.

9. Se encuentra experimentalmente que H_c decrece al aumentar la temperatura. Deduzca que el estado superconductor es más "ordenado" que el normal.
10. Pruebe que a $T = 0K$ $dH_c/dT = 0$.
11. Demuestre que en ausencia de campo magnético la transición de fase es de segundo orden termodinámico, pero de primer orden en presencia de campo.

Notas:

- Las magnitudes extensivas están referidas a la unidad de volumen.
- Se usa la convención $M = -H$.
- Desprecie el espesor de penetración.

9.3. Muestra delgada

En el problema anterior se mostró que el campo magnético crítico se relaciona con la función de Gibbs $g = G/V$ por

$$\frac{1}{2}\mu_o H_c^2 = g_n - g_s .$$

Este campo es a veces llamado campo crítico "termodinámico" y es una propiedad del espécimen masivo (dimensiones $\gg \lambda$). Considere ahora una placa muy grande, plana, de espesor $2a$, sumergida en un campo externo H_a paralelo a la placa.

1. Calcule B en el interior de la placa.
2. Demuestre que el momento magnético por unidad de área de la placa es

$$m = -2akH_a \quad k = 1 - \frac{\tanh(a/\lambda)}{a/\lambda} .$$

3. Muestre que la susceptibilidad magnética efectiva de la placa es $-k$ y no -1 , y que puede diferir mucho de -1 si la placa es delgada.
4. Suponiendo que la función de Gibbs (g_n , g_s) no depende del espesor, demuestre que el campo crítico de la placa es

$$H'_c = \frac{H_c}{\sqrt{k}}$$

y que es *mayor* que H_c si la placa es delgada.

5. Estime numéricamente el espesor de la placa necesario para que el incremento del campo crítico sea significativo (por ejemplo un factor 10).

9.4. Campo magnético crítico

Por termodinámica se sabe que la energía del superconductor por unidad de volumen aumenta con H desde cero hasta $\mu_o H^2/2$. Por otra parte, la energía al dejar de ser superconductor aumenta debido a la ruptura de los pares de Cooper. Suponga todos los electrones hasta una profundidad Δ bajo el nivel de Fermi están condensados.

1. Muestre que al romperse la superconductividad la energía por unidad de volumen aumenta aproximadamente en $\frac{1}{2}g(\epsilon_F)^2$
2. Muestre que si H es suficientemente bajo es energéticamente más conveniente que el sistema se mantenga superconductor
3. Deduzca que el campo magnético crítico a temperatura cero está dado por

$$\frac{1}{2}\mu_o H_c^2(T=0) = \frac{1}{2}g(\epsilon_F)\Delta_o^2$$

4. Sabiendo que en un metal normal se cumple que si $T \rightarrow 0$ entonces $C_V/T \rightarrow \gamma + BT^2$ y usando la relación entregada en clases entre Δ_o y T_c , muestre que

$$\frac{\mu_o H_o^2}{T_c^2} = 0,47$$

Ese resultado es una manera de comprobar si un superconductor se comporta según la teoría BCS o no

9.5. Superconductores tipo II

La existencia de superconductores de tipo II está asociada al efecto combinado de las longitudes de penetración λ y correlación ξ . En algunas ocasiones es termodinámicamente conveniente la penetración parcial del campo magnético, reduciendo a normal un sector del superconductor. Considere un bloque plano de gran extensión en las direcciones x e y , y de extensión L en la dirección z . Suponga que una fibra de campo magnético paralelo al eje z logra penetrar el bloque, reduciendo el material al estado normal en un sector cilíndrico. Suponga además que el campo H tiene intensidad uniforme dentro de un cilindro de radio λ , y que no hay superelectrones en un cilindro de radio ξ .

1. Recordando que la densidad de superelectrones es $\frac{1}{2}g(\epsilon_F)\Delta$ calcule la variación de energía debido al rompimiento de los pares de Cooper dentro del cilindro de radio ξ . Expresar esta energía en términos de H_c , el campo crítico termodinámico.
2. Calcule el aumento de energía magnética al aceptar H en el cilindro de radio λ . Suponga H uniforme dentro de este cilindro.

3. Calcule la variación total de energía al penetrar el campo en el cilindro. Se define la constante de Ginzburg Landau $\kappa = \lambda/\xi$. Demuestre que si $\kappa > 1$ es favorable que el campo empiece a penetrar para valores menores que H_c .
4. Dado $\kappa > 1$ calcule el campo H_{c1} al cual empieza a penetrar el superconductor en términos de H_c y κ .

9.6. Modelo simplificado para resultados de la teoría BCS

En este problema se propone un modelo simplificado para reproducir algunos resultados de la teoría BCS a $T = 0$. En el modelo de Sommerfeld un electrón se describe con una función de onda de la forma $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. La forma más general que puede adquirir la función de onda de un par de electrones de momenta opuestos se obtiene mezclando todos los estados $|\vec{p}\rangle$ y $|\vec{p}' = -\vec{p}\rangle$ en la forma

$$\phi(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \chi(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} d^3k = \phi(\vec{r} - \vec{r}') .$$

De este modo se satisface automáticamente la condición $\vec{p} + \vec{p}' = 0$. Note que $\phi(\vec{R}) = \phi(-\vec{R})$, como debe ser para un bosón.

1. Sea $V(\vec{r}, \vec{r}') = V(\vec{r} - \vec{r}')$ la interacción entre los electrones del par. Demuestre que en la representación de momenta la ecuación de Schrödinger tiene la forma

$$E - \frac{2\hbar^2 k^2}{2m} \chi(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \chi(\vec{k}') V(\vec{k}, \vec{k}') d^3k' .$$

2. Si el metal está a $T = 0$, todos los estados bajo el nivel de Fermi ($k < k_F$) están ocupados y no son accesibles a los electrones del par. Esto equivale a imponer

$$\chi(\vec{k}) = 0 \quad \text{si } k < k_F .$$

El potencial $V(\vec{r}, \vec{r}')$ es desconocido. Como aproximación se supondrá que todos sus elementos son idénticos si \vec{p} se encuentra en un pequeño cascarón en torno a la esfera de Fermi y cero en cualquier otro caso, es decir donde $V_o > 0$ (es decir V es atractivo) y ν es una frecuencia promedio de fonones (o cualquier otra cosa!).

3. Un estado ligado tendrá una energía $E < 2\varepsilon_F$ y la energía de "ionización" por electrón será

$$\Delta = 2\varepsilon - E .$$

Demuestre que existe un estado ligado de energía E si

$$V \cdot \frac{1}{2} \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F + h\nu} \frac{g(\varepsilon) d\varepsilon}{2\varepsilon - E} = 1 ,$$

donde $g(\varepsilon)$ es la densidad de estados en el metal de Sommerfeld

4. Demuestre que si $g(\varepsilon_F) \neq 0$, la ecuación anterior tiene solución con $E < 2\varepsilon_F$ para V_o arbitrariamente pequeño. Esto significa que sin importar cuán débil es la interacción, si esta es atractiva existirá un par de Cooper. Note que el papel del principio de exclusión de Pauli es crucial: si este límite inferior de la integral fuera 0 y no ε_F , entonces $g(0) = 0$, luego no podría haber solución con V_o arbitrario.
5. Suponga que en el intervalo $[\varepsilon_F, \varepsilon_F + h\nu]$ $g(\varepsilon) \simeq g(\varepsilon_F)$ y demuestre que

$$\Delta = \frac{2\hbar\omega}{e^{\frac{1}{g(\varepsilon_F)V_o}} - 1} ,$$

que en el límite de acoplamiento débil tiende a

$$\Delta \rightarrow 2\hbar\omega e^{\frac{1}{g(\varepsilon_F)V_o}} .$$

6. Sabiendo que $g(\varepsilon_F) \sim \frac{n}{\varepsilon_F}$, qué factores favorecen la superconductividad?

9.7. Efecto Josephson

Las matemáticas asociadas a la juntura Josephson pueden ser algo complicadas. Este problema provee una analogía mecánica que permite describir cualitativamente su comportamiento.

1. Estime la capacidad de una juntura Josephson de 1mm^2 de área. ¿Es despreciable?

2. Suponiendo que se aplica una tensión de 1 mV a la juntura, calcule el campo eléctrico en el interior. De aquí se deduce que no es evidente que se deba despreciar la conducción por electrones normales. Suponga que ésta es ohmica.
3. Si I es la corriente total que atraviesa la juntura Josephson, demuestre que:

$$I = \frac{hC}{2e} \frac{d^2\varphi}{dt^2} + \frac{h}{2eR} \frac{d\varphi}{dt} + i_c \sin\varphi$$

donde

- a) i_c es la corriente crítica de la juntura
 - b) C es la capacidad de la juntura, y
 - c) R es la resistencia de la juntura.
 - d) se usó φ por $\Delta\varphi$
 - Indicación: use los resultados sugeridos en 1 y 2
4. Considere un péndulo rígido de largo l , masa m concentrada en el extremo y sin roce en el pivote. Sea θ el ángulo con respecto a la vertical. Si la fuerza viscosa del aire es (roce) es $-\eta\dot{\theta}$ y se aplica un torque externo τ , derive la ecuación diferencial correspondiente
 5. Muestre que existe una analogía término a término entre la ecuación de la juntura y la del péndulo. Complete la siguiente tabla:

<i>Péndulo</i>	<i>Juntura</i>
<i>Deflexión θ</i>	
<i>Torque aplicado τ</i>	
<i>Momento de inercia</i>	
<i>Amortiguamiento viscoso η</i>	
<i>Desplazamiento horizontal $l\sin\theta$</i>	
<i>Velocidad angular $\omega = \frac{d\theta}{dt}$</i>	

6. Note que existe un torque crítico τ_c tal que torques menores (constantes) originan una deflexión permanente (Si, por el contrario, $\tau > \tau_c$, el péndulo da vueltas). ¿Qué conclusión puede derivar para la juntura usando esta analogía?

7. Si $\tau > \tau_c$ la velocidad angular del péndulo crece hasta alcanzar un estado cuasiestacionario en el cual $\langle \frac{d\theta}{dt} \rangle_T$ (promedio temporal en un ciclo) es constante. Use la analogía para derivar la frecuencia del efecto Josephson ac.
8. La corriente Josephson se relaciona con la fase a través de la juntura por

$$i = i_1 \sin \varphi$$

El mismo resultado se obtiene colocando $i_1 \sin(\varphi - \pi)$. Use la analogía para decidir entre φ y $\varphi - \pi$.

9.8. Efecto Josephson y el volt estándar

Referencias: Superconductor Industry, Primavera 1995, disponible en el laboratorio. Barone y Paterno, Physics and applications of the Josephson Effect.

1. Explique el fundamento físico que permite usar el efecto Josephson para fijar el volt estándar. ¿Cuál es la ventaja principal sobre otras posibilidades?
2. Indique la precisión que se puede alcanzar en la determinación del Volt estándar por medio del efecto Josephson. Compare con la que se obtiene con medios más convencionales (describalos).
3. ¿Cuántas juntas en serie son necesarias?
4. Describa que ocurre cuando la juntura Josephson se ilumina con fotones (frecuencia de microondas)
5. ¿Cómo se fabrican las juntas?
6. Explique cómo se usa en la práctica un chip de juntas Josephson
7. ¿Qué proporciona más precisión, el efecto Josephson o el efecto Hall cuántico? Justifique

9.9. Corriente permanente

Un anillo superconductor puede sustentar cualquier corriente permanente por debajo de la corriente crítica. Esto deja de ser efectivo si hay una junta Josephson o una junta débil (weak link). En este caso sólo algunas corrientes permanentes son posibles.

1. Demuestre que la energía libre por unidad de área de la junta es

$$f(\varphi) = \frac{\hbar J_1}{2e}(1 - \cos \varphi) \quad , \varphi \text{ por } \Delta\varphi$$

- Suponga la corriente túnel uniformemente distribuida en la junta
 - Considere dos sistemas separados, adscribiendo la junta a uno de ellos
 - Suponga el sistema 1 alimentado por una fuente de corriente I . Entonces el incremento en energía libre del subsistema 1 será $dF_1 = IV_1 dt$
 - Para la junta será $dF = dF_2 - dF_1$
 - Elija $F = 0$ si no circula corriente
2. Grafique $J(\varphi)$ y $F(\varphi)$ para un período. Muestre que a cada valor de la corriente le corresponden dos fases, pero una sola es estable (F mínimo).
 3. Suponiendo que no hay campo externo, pero que la autoinductancia del circuito no es despreciable, deduzca que la corriente que circula por él es

$$i = -i_1 \sin \frac{2\pi Li}{\phi_0}$$

o

$$x = -\text{sen} \beta x$$

donde $x = i/i_1$, y $\beta = \frac{2\pi Li_1}{\phi_0}$. Esta ecuación trascendental determina los valores posibles de la corriente permanente

4. No todas las soluciones de la ecuación anterior son estables. Demuestre que salvo una constante aditiva la energía libre del sistema es

$$F(x) = \frac{1}{2} LI_1^2 \left(x^2 - \frac{2}{\beta} \cos \beta x \right)$$

5. Para $\beta = 10\pi$ encuentre las dos primeras soluciones no nulas para x . Demuestre que una es estable y la otra no
6. ¿Existe siempre una solución estable para la ecuación? ¿Qué concluye físicamente?